

Ciencia e ingeniería de materiales

Donald R. Askeland
Wendelin J. Wright

7ª edición

Ciencia e ingeniería de materiales

Séptima edición

Donald R. Askeland
University of Missouri—Rolla, emérito

Wendelin J. Wright
Bucknell University

Edición SI preparada por:

D.K. Bhattacharya
Solid State Physics Laboratories, New Delhi

Raj P. Chhabra
Indian Institute of Technology, Kanpur

Traducción

Lorena Peralta Rosales
Traductora profesional

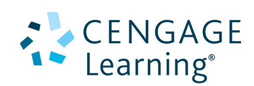
Revisión técnica

José Nicolás Ponciano Guzmán
Instituto Tecnológico de Morelia
Tecnológico de Monterrey
Campus Morelia

Leonel Ceja Cárdenas
Instituto Tecnológico de Morelia



Australia • Brasil • Corea • España • Estados Unidos • Japón • México • Reino Unido • Singapur



Ciencia e ingeniería de materiales
Séptima edición
Donald R. Askeland, Wendelin J. Wright

Presidente de Cengage Learning Latinoamérica:
Fernando Valenzuela Migoya

Director Editorial para Latinoamérica:
Ricardo H. Rodríguez

Gerente de Adquisiciones para Latinoamérica:
Claudia C. Garay Castro

Gerente de Manufactura para Latinoamérica:
Antonio Mateos Martínez

Gerente Editorial de Contenidos en Español:
Pilar Hernández Santamarina

Gerente de Proyectos Especiales:
Luciana Rabuffetti

Coordinador de Manufactura:
Rafael Pérez González

Editor:
Javier Reyes Martínez

Diseño de portada:
Mariana Sierra Enríquez

Imágenes de portada:
©Shutterstock

Composición tipográfica:
Rogelio Raymundo Reyna Reynoso

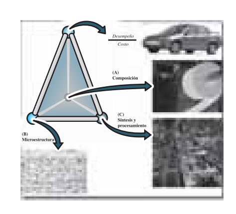
Traducido del libro
The Science and Engineering of Materials
7th edition
Donald R. Askeland, Wendelin J. Wright

Publicado en inglés por Cengage Learning © 2016
ISBN: 978-1-305-07710-2

Datos para catalogación bibliográfica:
Askeland, Donald R., Wright, Wendelin J.
Ciencia e Ingeniería de materiales
Séptima edición
ISBN: 978-607-526-062-4

Visite nuestro sitio web en:
http://latinoamerica.cengage.com

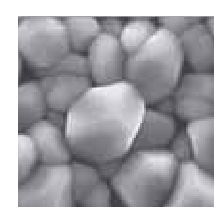
CONTENIDO

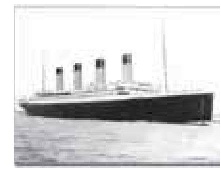

Desempeño
Costo
(A)
Composición
(C)
Síntesis y
procesamiento
(B)
Microestructura

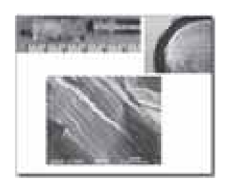












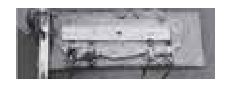
Capítulo 7 Propiedades mecánicas: segunda parte 229



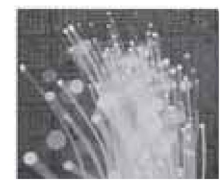
Capítulo 8 Endurecimiento por deformación y recocido 269



Capítulo 9 Principios de la solidificación 305





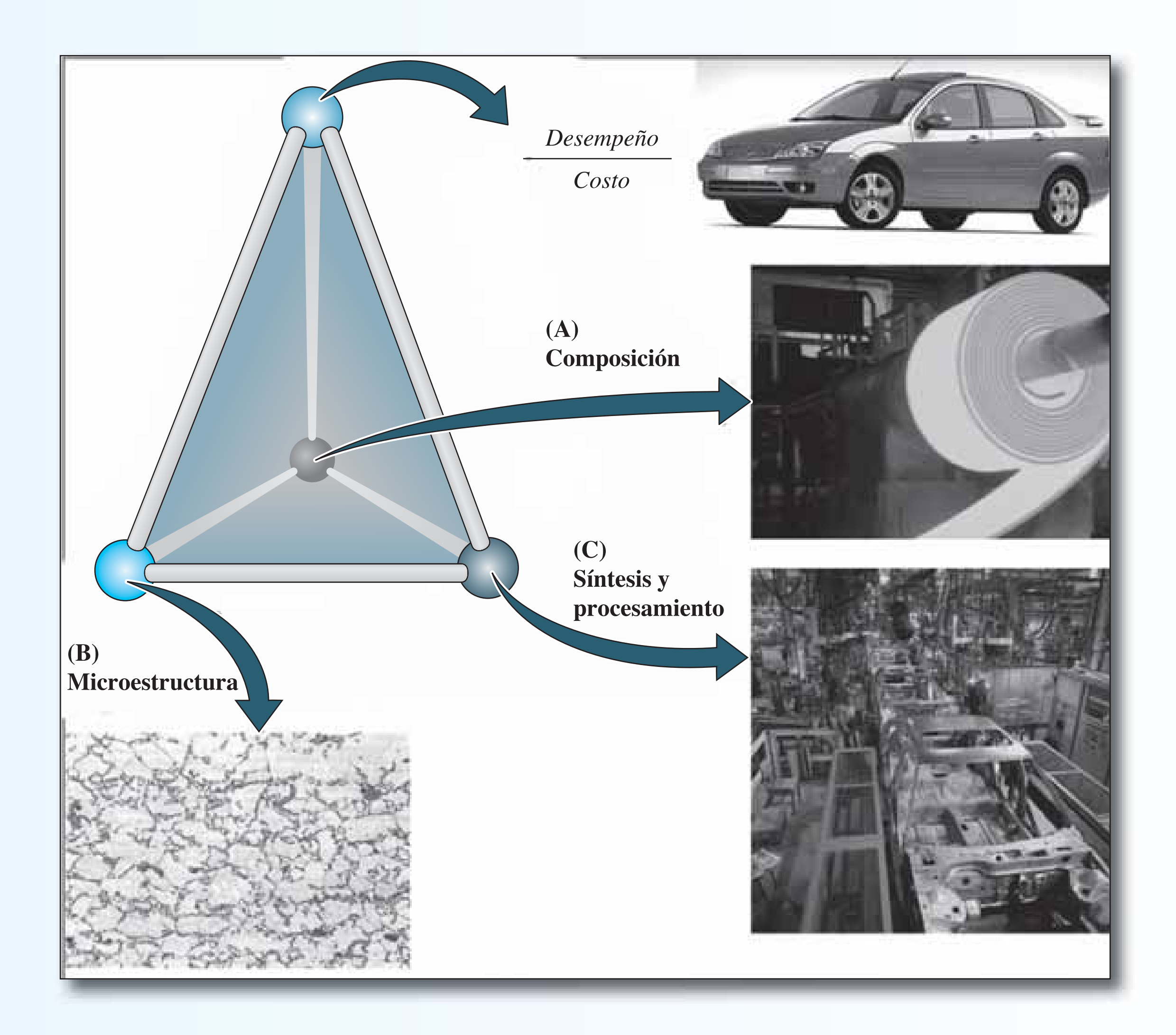







Ciencia e ingeniería de materiales

Séptima edición



Los objetivos principales de un científico e ingeniero de materiales son 1) mejorar los materiales existentes y 2) inventar o descubrir nuevos fenómenos, materiales, dispositivos y aplicaciones. Los avances en el campo de la ciencia e ingeniería de materiales se aplican a otros campos de estudio como la ingeniería biomédica, la física, la química, la ingeniería ambiental y la tecnología de información. El tetraedro de la ciencia e ingeniería de materiales que se muestra aquí representa el corazón y el alma de este campo y ejemplifica su empleo para producir acero para construir el bastidor de un automóvil. Como se muestra en este diagrama, el objetivo principal de un científico e ingeniero de materiales es desarrollar materiales o dispositivos que tengan el mejor desempeño en una determinada aplicación. En la mayoría de los casos, la razón desempeño/costo, a diferencia de sólo el desempeño, es de importancia máxima. El concepto se muestra como el vértice del tetraedro y las tres esquinas son representativas de A, la composición; B, la microestructura; y C, la síntesis y el procesamiento de materiales. Ellas están interconectadas y en última instancia afectan la razón desempeño/costo de un material o un dispositivo. La micrografía adjunta muestra la microestructura del acero inoxidable, diseñada para absorber energía durante las colisiones automovilísticas. Las partículas duras llamadas martensitas (oscuras) se dispersan en una matriz de ferritas relativamente blandas y dúctiles de color claro.

Para los científicos e ingenieros de materiales, los materiales son como la paleta de colores para un artista. Al igual que estos, que pueden crear distintas pinturas con base en diferentes colores, los científicos de materiales crean y mejoran distintos materiales por medio del empleo de diversos elementos de la tabla periódica y diferentes rutas de síntesis y procesamiento. (*Michael Shake/Shutterstock.com / Digital Vision/Getty Images / Digital Vision/Getty Images* / Metals Handbook, *Desk Edition (1998), ASM International, Materials Park, OH 440730002. Reimpreso con autorización de ASM International. Todos los derechos reservados. www.asminternational.org))*

CAPÍTULO

1

Introducción a la ciencia e ingeniería de materiales

Se ha preguntado alguna vez:

- *¿Qué estudian los científicos e ingenieros de materiales?*
- *¿Cómo se puede mejorar de forma significativa la eficiencia del combustible de un avión comercial con base en los materiales que se utilizan para su construcción?*
- *¿Si pueden fabricarse circuitos electrónicos flexibles y ligeros utilizando plásticos?*
- *¿Por qué los joyeros adicionan cobre al oro?*
- *¿Qué es un "material inteligente"?*

Objetivos de aprendizaje

Los objetivos clave de este capítulo son:

- Entender los conceptos principales que definen a la ciencia e ingeniería de materiales.
- Comprender el papel de la ciencia de materiales en el proceso de diseño.
- Clasificar los materiales con base en sus propiedades.
- Clasificar los materiales con base en su función.

En primer lugar este capítulo lo introducirá en el campo de la ciencia e ingeniería de materiales (CIM) por medio de diferentes ejemplos reales. Después lo introducirá a la clasificación de los materiales. Aunque la mayoría de los programas de ingeniería requieren que los estudiantes tomen un curso de ciencia de materiales, usted debe abordar el estudio de esta disciplina como algo más que una mera exigencia pedagógica. Un conocimiento profundo de la ciencia e ingeniería de materiales lo hará un mejor ingeniero y diseñador. La ciencia de materiales es la base de todos los avances tecnológicos, por lo que la comprensión de los conceptos básicos de los materiales y sus aplicaciones no sólo lo harán un mejor ingeniero, también lo ayudarán durante el proceso de diseño. Para ser un buen diseñador debe aprender cuáles materiales son apropiados para utilizar en distintas aplicaciones. Debe ser capaz de elegir el material correcto para su aplicación con base en sus propiedades, así como reconocer cómo podrían cambiar estas propiedades con el tiempo y debido al procesamiento. Cualquier ingeniero puede consultar las propiedades de los materiales en un libro o buscar en bases de datos un material que cumpla las especificaciones del diseño, pero

la **habilidad para innovar** e **incorporar materiales de manera segura** en un diseño tiene sus orígenes en la comprensión de cómo manipular sus propiedades y funcionalidades a través del control de la estructura y de las técnicas de procesamiento del material.

El aspecto más importante de los materiales es que se pueden hacer ciertas cosas con ellos, es decir, permiten que sucedan las cosas. Por ejemplo, en la historia de la civilización, materiales como la piedra, el hierro y el bronce desempeñaron funciones clave en el desarrollo de la humanidad. En el mundo vertiginoso actual, el descubrimiento de los monocristales de silicio y la comprensión de sus propiedades han permitido el desarrollo de la era de la información.

En este libro se proporcionan ejemplos convincentes de aplicaciones reales de los materiales de ingeniería. La diversidad de aplicaciones y los usos únicos de los materiales ilustran por qué un buen ingeniero debe comprender y conocer cómo aplicar los principios de la ciencia e ingeniería de materiales.

1-1 ¿Qué es la ciencia e ingeniería de materiales?

La **ciencia e ingeniería de materiales** (**CIM**) es un campo interdisciplinario que estudia y manipula la composición y estructura de los materiales a través de escalas de longitud para controlar las propiedades de los materiales por medio de la síntesis y el procesamiento. El término **composición** se refiere a la constitución química de un material. Por su parte, el vocablo **estructura** se remite a la descripción del arreglo de los átomos, es decir, cómo se observa a diferentes niveles de detalle. Los científicos e ingenieros de materiales no sólo se enfocan en el desarrollo de materiales, sino también en su **síntesis** y **procesamiento** y en los procesos de manufactura relacionados con la producción de componentes. El término "síntesis" se refiere a la forma en que se fabrican materiales a partir de sustancias químicas de estado natural o hechas por el hombre. El término "procesamiento" implica cómo se transforman materiales en componentes útiles para provocar cambios en las propiedades de diferentes materiales. Una de las funciones más importantes de los científicos e ingenieros que estudian esta disciplina es establecer las relaciones entre las propiedades de un material o un dispositivo y el desempeño y la microestructura del material, su composición y la manera en la que el material o dispositivo se sintetizó y procesó. La **ciencia de materiales** se enfoca en las relaciones básicas entre la síntesis y el procesamiento, la estructura y las propiedades de los materiales. Por su parte, la **ingeniería de materiales** se concentra en las formas de convertir o transformar los materiales en dispositivos o estructuras útiles.

Uno de los aspectos más fascinantes de la ciencia de materiales involucra la investigación de la estructura de un material. La estructura de los materiales tiene una influencia profunda sobre muchas propiedades de estos, ¡aún si la composición general no cambia! Por ejemplo, si toma un alambre de cobre puro y lo dobla de manera repetida, ¡el alambre no sólo se endurece sino que también se vuelve cada vez más quebradizo! Con el tiempo, el alambre de cobre puro se hace tan duro y quebradizo ¡que se romperá! La resistividad eléctrica del alambre también aumentará a medida que se doble de manera repetida. En este ejemplo sencillo, observe que no se modificó la composición del material (es decir, su constitución química). Los cambios en las propiedades del material se deben a un cambio en su estructura interna. Si examina el alambre después de doblarse observará lo mismo que antes; sin embargo, su estructura ha cambiado a escala microscópica. A escala microscópica, la estructura se conoce como **microestructura**. Si es posible comprender lo que ha cambiado de forma microscópica, se comenzarán a descubrir maneras de controlar las propiedades de los materiales.

Examine un ejemplo utilizando el **tetraedro de la ciencia e ingeniería de materiales** que se presenta en la figura 1-1. (En la página de apertura del capítulo se ofrece otro ejemplo). Durante la mayor parte de la historia de la aviación comercial, los fuselajes de los aviones se fabricaron con aleaciones de aluminio. El material del fuselaje debe poseer una resistencia suficientemente alta y a la vez ser ligero y moldeable en contornos aerodinámicos. El aluminio es un material que cumple con estos requisitos. En 2011, los pasajeros comenzaron a viajar en los aviones 787 Dreamliner de Boeing. Una de sus innovaciones principales es el uso extensivo de **materiales compuestos,** es decir, aquellos que se forman mediante la incorporación de componentes múltiples en un material, de manera que las propiedades de la combinación resultante son únicas y no se podrían obtener de otro modo. Los materiales compuestos representan la mitad del peso total del Dreamliner y su fuselaje está hecho de plástico reforzado con fibra de carbono. El plástico reforzado con fibra de carbono es un compuesto de fibra de carbono en una matriz de resina epoxi de polímero.

Desempeño
Costo

- ¿En qué medida se puede reducir el peso del fuselaje si se emplean materiales compuestos?
- ¿Cuántos pasajeros caben en un avión con fuselaje compuesto?
- ¿Cuál es su costo de fabricación? ¿Se compensa el costo con los ahorros de combustible?

***A*: Composición**
- ¿Qué materiales deben usarse en la matriz?
- ¿Con qué materiales se deben reforzar?
- ¿Qué volumen porcentual debe ocupar el reforzamiento?

***C*: Síntesis y procesamiento**
- ¿Qué proceso debe emplearse para fabricar el fuselaje?
- ¿Cómo se pueden incorporar los componentes al material?
- ¿Se puede implementar el procesamiento con confiabilidad suficiente?

***B*: Microestructura**
- ¿Cómo se debe organizar la fase de reforzamiento de la matriz?
- ¿Cuáles son las características de la estructura que afectan su confiabilidad?
- ¿Qué controla la fuerza?

Figura 1-1 Aplicación del tetraedro de la ciencia e ingeniería de materiales a los plásticos reforzados de fibras de carbono para fabricar fuselajes de aeronaves. Observe que la composición, la microestructura y la síntesis-procesamiento están interconectadas y afectan la razón desempeño/costo. Aparecen en el sentido de las manecillas del reloj a partir del lado superior derecho: el Boeing 787, el interior del fuselaje vacío de un Boeing 787, fibra de carbono en una matriz epoxi. [*Bloomberg* a través de Getty Images / Srinivasa, Vinod, Shivakumar, Vinay, Nayaka, Vinay, Jagadeeshaiaih, Sunil, Seethram, Murali, Shenoy, Raghavendra, & Nafidi, Abdelhakim. (2010). *Fracture morphology of carbon fiber reinforced plastic composite laminates*. Materials Research, vol. 13(3), pp. 417-424. Recuperado el 6 de enero de 2014 de http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1516-14392010000300022&lng=en&tlng=en. 10.1590/S1516 -14392010000300022./ AFP/Getty Images / Aviation Images]

Después de varias décadas de fabricar modelos exitosos de aviones, Boeing invirtió miles de millones de dólares para desarrollar un avión comercial con base en una nueva clase de materiales. ¿Por qué tomó esta decisión? La principal motivación para usar plástico reforzado con fibras de carbono fue reducir el peso del fuselaje para incrementar la eficiencia del combustible, lo que también ha aumentado la razón desempeño/costo de la aeronave.

El cambio hacia el uso de materiales compuestos implicó una gran cantidad de retos técnicos. ¿Qué material compuesto se debería emplear? ¿Cómo se dará forma al fuselaje? Los datos recabados durante décadas demuestran que se forman grietas en el aluminio como resultado de los despegues y aterrizajes. ¿El nuevo material compuesto será confiable? ¿Un plástico reforzado con fibra de carbono tendrá la misma resistencia a la corrosión que el aluminio o experimentará una

deslaminación entre los plásticos y las fibras? Las aeronaves de aluminio tienen paneles estructurales remachados. ¿Cómo se unirán los componentes estructurales del material compuesto? En este análisis podemos observar que es necesario considerar muchas cuestiones durante el proceso de diseño y la selección de materiales de cualquier producto, además de que la razón desempeño/costo, la composición, la microestructura y la síntesis y el procesamiento son factores críticos.

Un ejemplo más de la aplicación del tetraedro de la ciencia e ingeniería de materiales es el empleo de una clase de materiales conocidos como polímeros semiconductores (figura 1-2) en dispositivos microelectrónicos. Muchos tipos de pantallas, como las que se encuentran en los despertadores y los relojes, usan diodos emisores de luz (light emiting diodes, LED) elaborados con compuestos inorgánicos basados en arseniuro de galio (GaAs) y otros materiales. La ventaja del uso de plásticos en la microelectrónica es que son flexibles y fáciles de procesar. Las preguntas que deben responder los científicos e ingenieros en materiales sobre las aplicaciones de los polímeros semiconductores son

- ¿Cuáles son las relaciones entre la estructura de los polímeros y sus propiedades eléctricas?
- ¿Cómo pueden fabricarse dispositivos con el empleo de estos plásticos?
- ¿Estos dispositivos serán compatibles con la tecnología del chip de silicio existente?
- ¿Cuán robustos son estos dispositivos?
- ¿Cómo se compararán el desempeño y el costo de estos dispositivos con los dispositivos tradicionales?

Estos son sólo algunos de los factores que los ingenieros y científicos deben considerar durante el desarrollo, diseño y fabricación de los dispositivos de polímeros semiconductores.

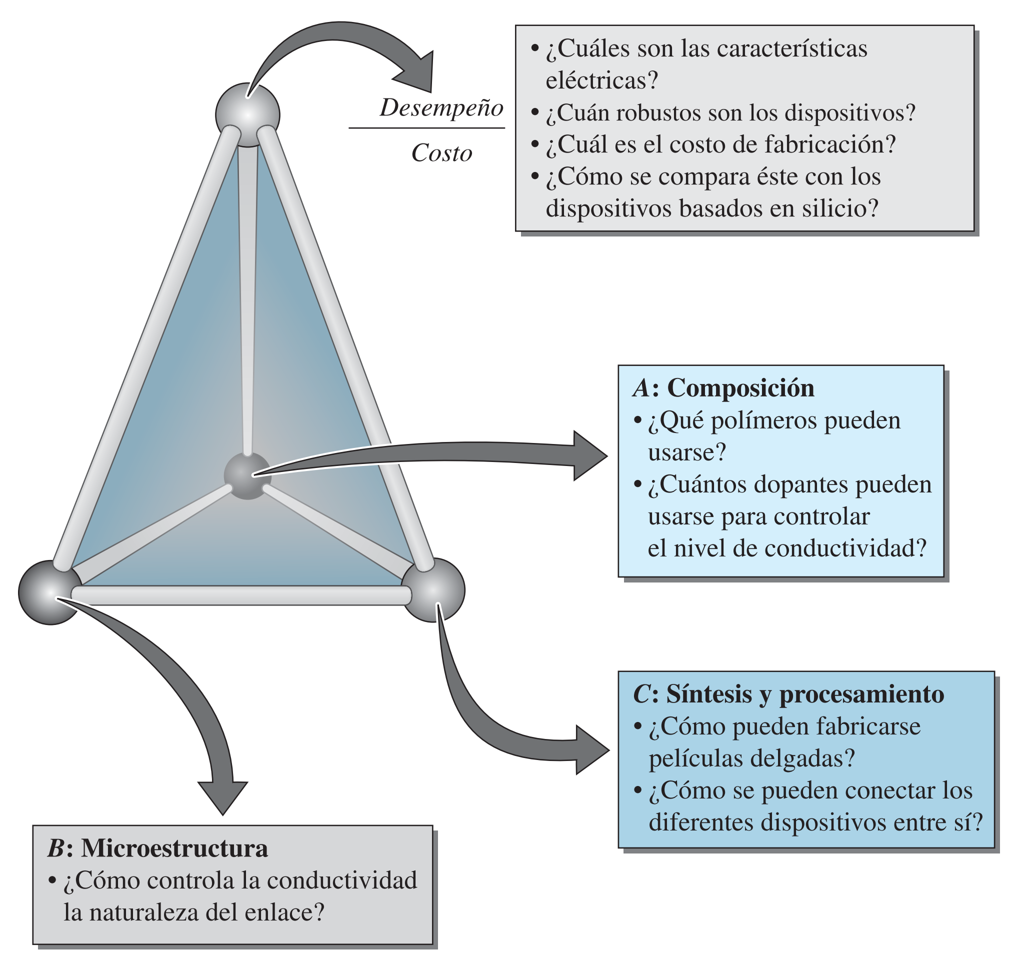


Figura 1-2 Aplicación del tetraedro de la ciencia e ingeniería de materiales a polímeros semiconductores en microelectrónica.

1-2 Clasificación de los materiales

Existen formas diferentes de clasificar los materiales. Una de ellas es describir cinco grupos (tabla 1-1):

1. **Metales** y **aleaciones**
2. **Cerámicas, vidrios y vidrios cerámicos**
3. **Polímeros** (plásticos)
4. **Semiconductores** y
5. **Materiales compuestos**

Tabla 1.1 Ejemplos, aplicaciones y propiedades representativas de cada categoría de materiales

	Ejemplos de aplicaciones	Propiedades
Materiales y aleaciones		
Cobre	Alambre conductor eléctrico	Conductividad eléctrica alta, buena formabilidad
Hierro colado gris	Bloques de motores de automóviles	Moldeable, maquinable, amortiguador de vibraciones
Aceros de aleación	Llaves inglesas, chasis de automóviles	Endurecimiento significativo por tratamiento térmico
Cerámicas y vidrios		
SiO_2-Na_2O-CaO	Vidrios de ventanas	Ópticamente transparente, aislante térmico
Al_2O_3, MgO, SiO_2	Refractarios (es decir, recubrimientos resistentes al calor de horno) para contener metal fundido	Aislantes térmicos, soportan altas temperaturas, relativamente inertes al metal fundido
Titanato de bario	Capacitores para microeléctrica	Alta capacidad de almacenamiento de carga
Sílice	Fibras ópticas para tecnología de la información	Pérdidas ópticas bajas
Polímeros		
Polietileno	Empaquetamiento de alimentos	Fácilmente convertible en películas delgadas, flexibles y herméticas
Epoxi	Encapsulado de circuitos integrados	Aislante de electricidad y resistente a la humedad
Fenólicos	Adhesivos para unir capas de madera laminada	Fuertes, resistentes a la humedad
Semiconductores		
Silicio	Transistores y circuitos integrados	Comportamiento eléctrico único
GaAs	Sistemas optoelectrónicos	Convierte señales eléctricas en luz, se usa en láseres, diodos láser, etc.
Compuestos		
Grafito-epoxi	Componentes para aviones	Razón resistencia/peso alta
Carburo de tungsteno-cobalto (WC-Co)	Herramientas de corte de carburo para maquinado	Dureza alta, pero buena resistencia al impacto
Acero revestido de titanio	Contenedores de reactores	Costo bajo y resistencia alta del acero con la resistencia a la corrosión del titanio

Los materiales que integran cada uno de estos grupos poseen estructuras y propiedades distintas. Las diferencias en resistencia, las cuales se comparan en la figura 1-3, ilustran el amplio intervalo de propiedades a partir de las cuales pueden seleccionar los ingenieros. Dado que los materiales metálicos se usan en gran medida en aplicaciones para soportar cargas, sus propiedades mecánicas son de gran interés práctico. Aquí se introducirán de manera breve. El término "esfuerzo" se refiere a la carga o fuerza por unidad de área. La "deformación unitaria" se relaciona con la elongación o cambio en dimensión dividido entre la dimensión original. La aplicación del esfuerzo provoca la "deformación". Si la deformación desaparece después de que se retira la carga o el "esfuerzo" aplicado, se dice que la deformación es "elástica". Por el contrario, si permanece después de que se elimina el esfuerzo, se dice que es "plástica". Cuando la deformación es elástica, el esfuerzo y la deformación están relacionados de manera lineal; a la pendiente del diagrama esfuerzo-deformación unitaria se le conoce como módulo elástico o de Young. Al nivel de esfuerzo necesario para iniciar la deformación plástica se le denomina "límite elástico". El porcentaje máximo de deformación que se puede obtener es una medida de la ductilidad de un material metálico. Estos conceptos se explicarán más adelante en los capítulos 6 y 7.

Metales y aleaciones Los metales incluyen aluminio, magnesio, zinc, hierro, titanio, cobre y níquel. Una aleación es un metal que contiene adiciones de uno o más metales o no metales; por ejemplo, el acero es una aleación de hierro con adiciones de carbono. En general, los metales tienen buenas conductividades eléctricas y térmicas. Además, igual que las aleaciones tienen resistencias relativamente altas, gran rigidez, ductilidad o formabilidad y resistencia al impacto. Son particularmente útiles para aplicaciones estructurales o de carga. Aunque en ocasiones se usan metales puros, las aleaciones pueden mejorar una propiedad deseable específica o permiten mejores combinaciones de las propiedades. Por ejemplo, el oro puro es un metal blando, por lo que los joyeros le adicionan cobre para mejorar su resistencia con la finalidad de que las joyas de oro no se dañen con facilidad.

Cerámicas Las cerámicas pueden definirse como materiales cristalinos inorgánicos. La arena de playa y las rocas son ejemplos de cerámicas en estado natural. Las cerámicas avanzadas, que son materiales preparados por medio de la refinación de cerámicas de estado natural y otros procesos especiales, se usan en los sustratos que albergan chips de computadora, sensores y activadores, capacitores, comunicaciones inalámbricas, generadores de chispa, inductores y aislantes eléctricos. Algunas cerámicas se utilizan como recubrimientos de barrera para proteger los sustratos metálicos en

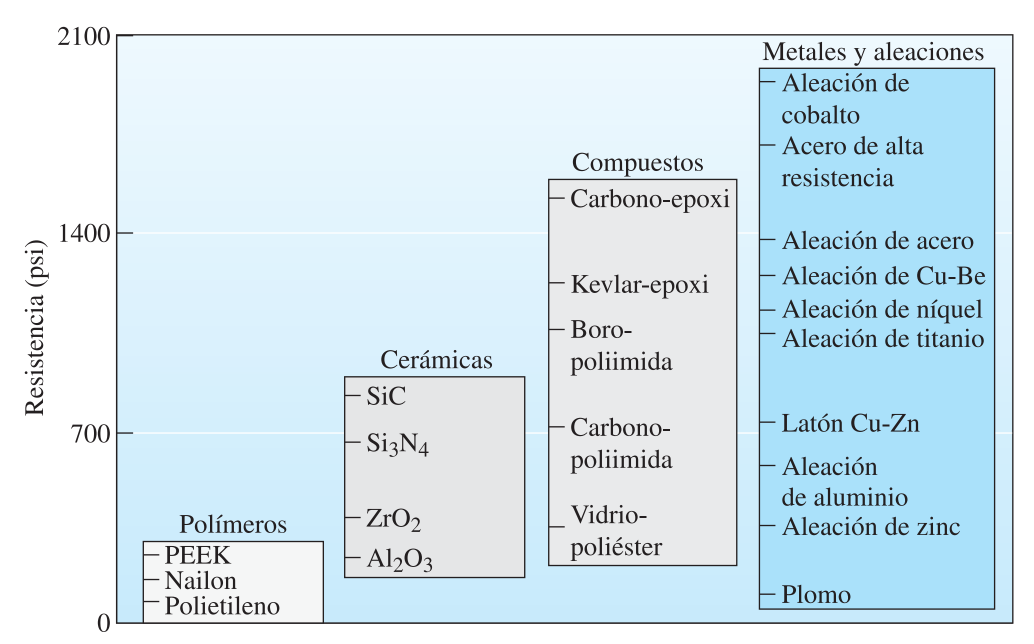


Figura 1-3 Resistencias representativas de varias categorías de materiales. Se muestra la resistencia de las cerámicas a la compresión.

motores de turbinas. También se usan en productos de consumo como pinturas, plásticos, neumáticos y en aplicaciones industriales como los sensores de oxígeno que usan los automóviles. Se recurre a las cerámicas tradicionales para fabricar ladrillos, vajillas, accesorios de baño, refractarios (material resistente al calor) y abrasivos. En general, las cerámicas no conducen bien el calor, y deben calentarse a temperaturas muy altas antes de fundirse. Asimismo, son resistentes y duras, pero también son quebradizas. Por lo regular se preparan polvos finos de cerámicas y se convierten en distintas formas. Las nuevas técnicas de procesamiento permiten fabricar cerámicas lo suficientemente resistentes a la fractura que pueden utilizarse en aplicaciones de carga, como los impulsores en los motores de turbinas. Las cerámicas tienen una resistencia excepcional bajo compresión. ¿Puede creer que todo un camión de bomberos puede soportarse con ayuda de cuatro tazas de cerámica para café?

Vidrios y vidrios-cerámicos El vidrio es un material amorfo; con frecuencia, aunque no siempre, derivado de un líquido fundido. El término “amorfo” se refiere a materiales que no poseen un arreglo regular y periódico de átomos. Los materiales amorfos se explicarán en el capítulo 3. La industria de la fibra óptica se basa en fibras ópticas compuestas por vidrios de sílice de alta pureza. Los vidrios también se usan en casas, automóviles, pantallas de computadoras, televisores, smartphones y en cientos de otras aplicaciones. Los vidrios pueden tratarse de manera térmica (templarse) para hacerlos más resistentes. La formación de vidrios y la nucleación (formación) de cristales pequeños dentro de ellos por medio de un proceso térmico especial crean materiales a los que se conoce como vidrios-cerámicos. El Zerodur^MR es un ejemplo de un material de vidrio-cerámico que se usa para construir los sustratos de espejos para grandes telescopios (por ejemplo, los telescopios Chandra y Hubble). Por lo general, los vidrios y los vidrios-cerámicos se procesan por fusión y colado.

Polímeros Por lo general, los polímeros son materiales orgánicos. Se producen por medio de un proceso conocido como **polimerización**. Los materiales poliméricos incluyen al caucho (elastómeros) y muchos tipos de adhesivos. Los más comunes son buenos aislantes eléctricos y térmicos, aunque existen excepciones. A pesar de que poseen una resistencia más baja que los metales o las cerámicas, los polímeros tienen una muy buena **razón resistencia/peso**. Por lo regular no se pueden usar a altas temperaturas, pero muchos de ellos tienen muy buena resistencia a sustancias químicas corrosivas. Además, tienen miles de aplicaciones que van desde chalecos antibalas, discos compactos (CD), cuerdas y pantallas de cristal líquido (LCD) hasta vestimenta y tazas para café. Los polímeros **termoplásticos**, en los que las cadenas moleculares grandes no están conectadas de manera rígida, tienen buena ductilidad y formabilidad; los polímeros **termoestables** son más resistentes, pero más quebradizos, debido a que las cadenas moleculares están enlazadas de manera cruzada (figura 1-4). Todos ellos se usan en muchas aplicaciones, entre las cuales se encuentran diversos dispositivos electrónicos. Los termoplásticos se fabrican moldeando su forma

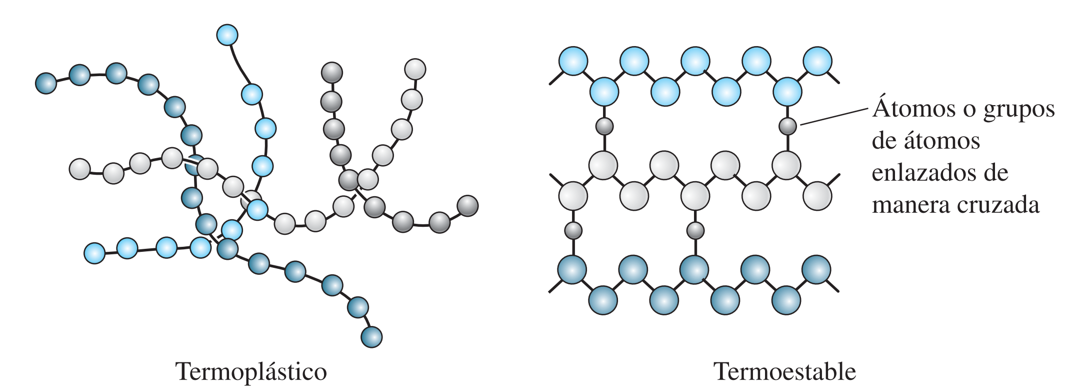


Figura 1-4 La polimerización ocurre cuando se combinan moléculas pequeñas, representadas por los círculos, para producir moléculas más grandes, o polímeros. Las moléculas de estos pueden tener una estructura que consiste en varias cadenas que estén enredadas pero no conectadas (termoplásticos) o pueden formar redes tridimensionales en las cuales las cadenas tienen enlaces cruzados (termoestables).

fundida. Por lo general, los termoestables se cuelan en moldes. Los **plásticos** contienen aditivos que mejoran las propiedades de los polímeros.

Semiconductores Los semiconductores basados en silicio, germanio y arseniuro de galio, como los que se usan en computadoras y dispositivos electrónicos son parte de una amplia clase de materiales conocidos como materiales electrónicos. La conductividad eléctrica de los materiales semiconductores se encuentra entre la de los aislantes cerámicos y la de los conductores metálicos. Los semiconductores han permitido la era de la información. En algunos de ellos el nivel de conductividad puede controlarse para producir dispositivos electrónicos, como transistores y diodos, que se usan para construir circuitos integrados. En muchas aplicaciones se necesitan monocristales grandes de semiconductores que se producen a partir de materiales fundidos. Con frecuencia, también se fabrican películas delgadas de materiales semiconductores mediante procesos especializados.

Materiales compuestos La idea principal que subyace al desarrollo de compuestos es combinar las propiedades de distintos materiales. Se forman a partir de dos o más materiales, lo cual genera propiedades que no se encuentran en ningún material simple. El concreto, la madera laminada y la fibra de vidrio son ejemplos de materiales compuestos. La fibra de vidrio se prepara por medio de la dispersión de fibras de vidrio en una matriz de polímero. Dichas fibras otorgan mayor rigidez al polímero, pero no incrementan de forma significativa su densidad. Con los compuestos se pueden producir materiales ligeros, resistentes, dúctiles y resistentes a las temperaturas, o herramientas de corte rígidas, pero resistentes al impacto que de otra manera las rompería. En gran medida, los aviones avanzados y los vehículos aeroespaciales dependen de materiales compuestos. Como se analizó en secciones anteriores, el Boeing 787 usa plástico reforzado con fibras de carbono en lugar de aluminio en muchos de sus componentes, lo que mejora el rendimiento del combustible. Ciertos equipos deportivos como bicicletas, palos de golf, raquetas de tenis y similares también emplean distintos tipos de materiales compuestos que son ligeros y rígidos.

1-3 Clasificación funcional de los materiales

Los materiales se pueden clasificar con base en la función más importante que desempeñan, es decir, si dicha función es mecánica (estructural), biológica, eléctrica, magnética u óptica. Esta clasificación de los materiales se presenta en la figura 1-5, donde también se muestran algunos ejemplos de cada categoría. Estas categorías pueden dividirse en subcategorías.

Aeroespaciales En el vuelo histórico de los hermanos Wright se usaron materiales ligeros como madera y una aleación de aluminio (que de manera accidental le dio aún más resistencia al motor cuando se contaminó con el cobre del molde que se usó para su colado). En la actualidad, el transbordador espacial de la NASA usa polvo de aluminio para construir cohetes impulsores y sílice para fabricar los lazos. El fuselaje y las alas del Boeing 787 están compuestas principalmente por plástico reforzado con fibras de carbono.

Biomédicos Los huesos y dientes están constituidos, en parte, por una cerámica formada de manera natural conocida como hidroxiapatita. Varios órganos artificiales, partes de reemplazo de huesos, cánulas cardiovasculares, aparatos de ortodoncia y otros componentes se fabrican con diferentes plásticos, aleaciones de titanio y aceros inoxidables no magnéticos. Los sistemas de imagen ultrasónica usan cerámicas conocidas como PZT (titanato de zirconio de plomo).

Materiales electrónicos Como ya se mencionó, los semiconductores, como los que se fabrican de silicio, se usan para fabricar circuitos integrados para chips de computadoras. El titanato de bario ($BaTiO_3$), el óxido de tantalio (Ta_2O_5) y muchos otros materiales dieléctricos se emplean para fabricar capacitores cerámicos y otros dispositivos. El cobre, el aluminio y otros metales se usan como conductores en la transmisión de electricidad y en la microelectrónica.

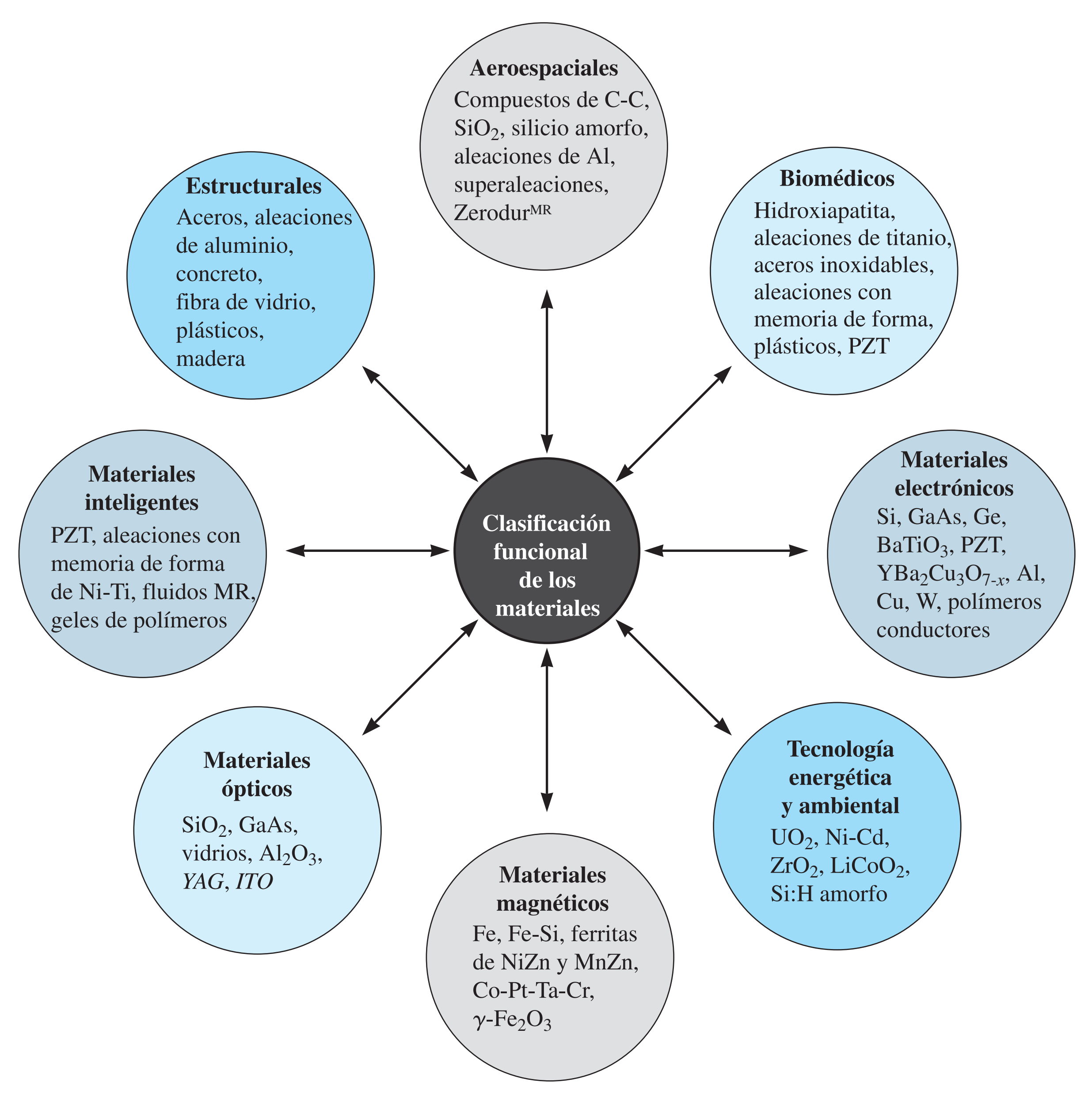


Figura 1-5 Clasificación funcional de los materiales. Observe que los metales, los plásticos y las cerámicas aparecen en categorías distintas. Se proporciona un número limitado de ejemplos en cada categoría.

Tecnología energética y tecnología ambiental La industria nuclear emplea materiales, como el dióxido de uranio y el plutonio, como combustibles. Se recurre a otros muchos materiales, como vidrios y aceros inoxidables, para manejar materiales nucleares y desechos radiactivos. Las nuevas tecnologías relacionadas con las baterías y las celdas de combustible usan diversos materiales cerámicos, como la zirconia (ZrO_2) y los polímeros. La tecnología de las baterías ha adquirido una importancia significativa debido a la necesidad que tienen muchos dispositivos electrónicos de contar con energía portátil y más duradera. Las celdas de combustible también se usarán en automóviles eléctricos. Las industrias del aceite y petrolera usa ampliamente zeolitas, alúmina y otros materiales como sustratos catalizadores. Usan como catalizadores Pt, Pt/Rh y otros metales. Muchas tecnologías de membranas para la purificación de líquidos y gases usan cerámicas y plásticos. La energía solar se genera con base en el empleo de materiales, como silicio amorfo (a:Si:H).

Materiales magnéticos Los discos duros de las computadoras contienen muchos materiales cerámicos, metálicos y poliméricos, dado que se fabrican utilizando aleaciones basadas



El cuarzo, también conocido como sílice, cuya fórmula química es SiO_2, es el mineral que se encuentra en la arena. Este material es uno de los más abundantes en la Tierra. Si lo consideramos con base en su peso, el costo de la arena es muy económico; sin embargo, la sílice es el material que se refina para fabricar el silicio de grado electrónico, uno de los materiales más puros y casi perfectos que hay en el mundo. Las obleas de silicio son los sustratos de los microchips, como los que se encuentran en el procesador de su computadora. En tanto que una tonelada de arena podría costar sólo 10 dólares, una tonelada de microchips de silicio vale miles de millones de dólares.

La imagen anterior muestra un cristal de cuarzo. Un material cristalino en el que los átomos están ordenados en un arreglo regular repetitivo. Las facetas de los cristales reflejan el orden de largo alcance de los arreglos atómicos. (*Galyna Andrushko/ Shutterstock.com*)



Arreglos atómicos e iónicos

Se ha preguntado alguna vez:

- *¿Qué es el silicio amorfo y en qué es distinto del silicio que se usa para fabricar chips de computadora?*
- *¿Qué son los cristales líquidos?*
- *Si fuera a empacar una caja cúbica con esferas de tamaño uniforme, ¿cuál es el empaquetamiento máximo posible?*
- *¿Cómo se puede calcular la densidad de los distintos materiales?*

Objetivos de aprendizaje

Los objetivos clave de este capítulo son:

- Visualizar la forma en la que los átomos se distribuyen en estructuras de cristal cúbicas centradas en la cara, centradas en el cuerpo y hexagonales compactas, y definir las relaciones espaciales entre los átomos en estas estructuras. Con base en los parámetros de una estructura de cristal distinta de las enumeradas, visualizar los arreglos atómicos
- Determinar las propiedades de los materiales cristalinos con base en su estructura de cristal (por ejemplo, la densidad de su masa y el tamaño relativo de los sitios intersticiales).
- Identificar los planos y direcciones compactos de las estructuras de cristal.
- Identificar y utilizar el índice de Miller de las direcciones y planos en un sistema coordinado de cristal.

Los arreglos de átomos e iones desempeñan una función importante para determinar la microestructura y las propiedades de un material. Los objetivos principales de este capítulo son:

a) aprender a clasificar los materiales con base en sus arreglos atómicos/iónicos y
b) describir los arreglos de los sólidos cristalinos con base en conceptos de la **red**, la **base** y la **estructura cristalina**.

En el caso de los sólidos cristalinos se ilustrarán los conceptos de redes de Bravais, celdas unitarias, direcciones cristalográficas y planos por medio del examen de los arreglos de átomos o iones en muchos materiales de importancia tecnológica, entre ellos, los metales (por ejemplo, Cu, Al, Fe, W, Mg), los semiconductores (por ejemplo, Si, Ge, GaAs), las cerámicas avanzadas (por ejemplo, ZrO_2, Al_2O_3, $BaTiO_3$, etc.), el diamante y muchos otros. También se desarrollará la nomenclatura necesaria que se utiliza para caracterizar los arreglos atómicos o iónicos en los materiales cristalinos. Se examinará el uso de la **difracción de rayos x** (DRX), de la **microscopía electrónica de transmisión** (MET) y de la **difracción de electrones**. Estas técnicas permiten explorar los arreglos de los átomos/iones en los distintos materiales. Se presentará una visión general de los tipos diferentes de **materiales amorfos** como el silicio amorfo, los vidrios metálicos, los polímeros y los vidrios inorgánicos.

En el capítulo 2 se hizo hincapié en cómo influye el enlace interatómico en ciertas propiedades de los materiales. En este capítulo el enfoque se centrará en la influencia de los arreglos atómicos y iónicos sobre las propiedades de los materiales de ingeniería. En particular, se concentrará en los arreglos "perfectos" de los átomos o iones en los sólidos cristalinos.

Los conceptos que se explican en este capítulo lo prepararán para comprender cómo las *desviaciones* de estos arreglos perfectos de los materiales cristalinos crean lo que se describe como defectos a nivel atómico. En este contexto el término **defecto** se refiere a la falta de perfección del orden atómico o iónico de los cristales y no a cualquier falla o cualidad de un material de ingeniería. En el capítulo 4 se describirán cómo estos defectos atómicos en realidad permiten el desarrollo de los aceros formables y resistentes que se usan en los automóviles y las construcciones, las aleaciones de aluminio para aviones, las celdas solares y los módulos fotovoltaicos para los satélites y muchas otras tecnologías.

3-1 Orden de corto alcance frente a orden de largo alcance

En los distintos estados de la materia se pueden definir cuatro tipos de arreglos (o distribuciones) atómicos o iónicos (figura 3-1).

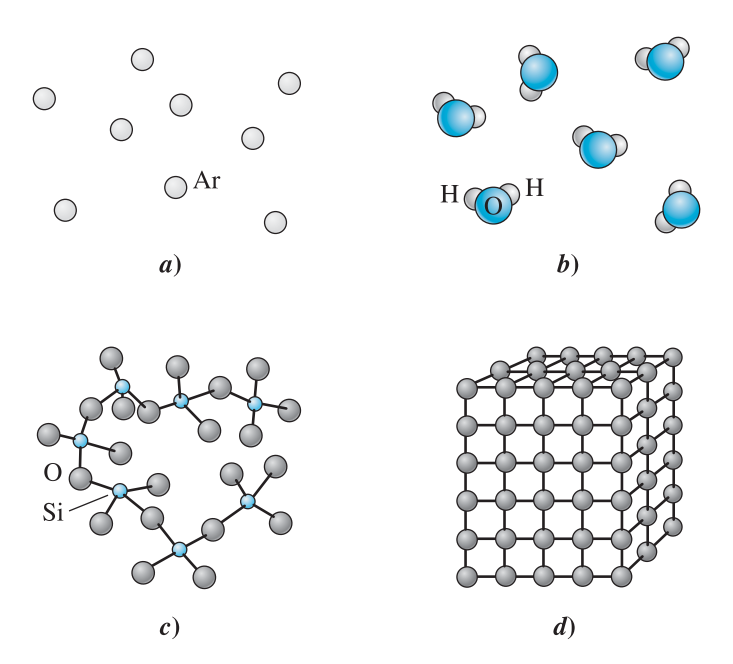


Figura 3-1 Niveles de arreglos atómicos en los materiales: *a*) Los gases monoatómicos inertes no tienen un ordenamiento regular de átomos. Algunos materiales, entre ellos el vapor de agua y *b*) el vidrio de silicato *c*) tienen orden de corto alcance. *d*) Los metales, las aleaciones, muchas cerámicas y algunos polímeros tienen un ordenamiento regular de átomos/iones que se extiende a lo largo del material.

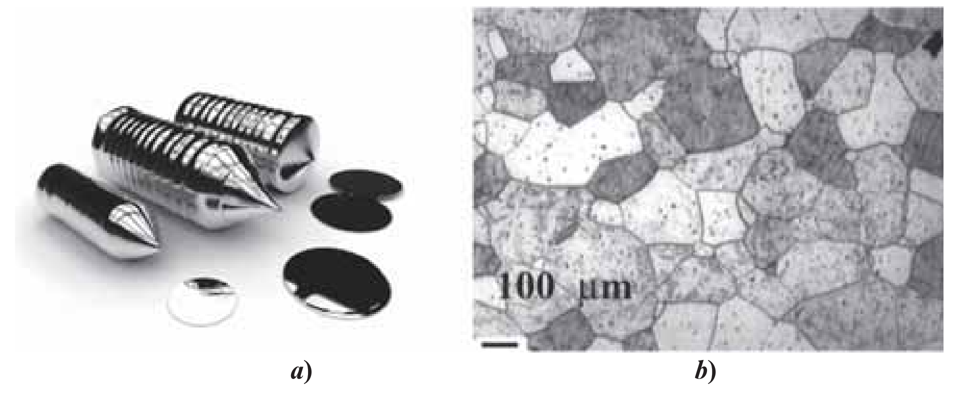
Sin orden En los gases monoatómicos, como el argón (Ar) o el plasma creado en una lámpara fluorescente, los átomos o iones no tienen un arreglo ordenado.

Orden de corto alcance Un material muestra un **orden de corto alcance** (OCA) si el arreglo especial de los átomos sólo se extiende a los átomos vecinos más cercanos. Cada molécula de agua del vapor tiene un orden de corto alcance debido a los enlaces covalentes entre los átomos de hidrógeno y oxígeno; es decir, cada átomo de oxígeno se une a dos átomos de hidrógeno para formar un ángulo de 104.5° entre los enlaces. Sin embargo, no existe un orden de largo alcance, debido a que las moléculas de agua que conforman el vapor no tienen un arreglo especial con respecto a la posición de las demás.

Existe una situación similar en los materiales conocidos como vidrios inorgánicos. En la sección 2-5 se describió la estructura tetraédrica de la sílice que cumple el requerimiento de que cuatro iones oxígeno estén enlazados a cada ion silicio. Como se explicará más adelante, en el vidrio, las unidades tetraédricas individuales se unen entre sí de manera aleatoria. Estos tetraedros pueden compartir esquinas, aristas o caras. Por lo tanto, más allá de la unidad básica de un tetraedro de $(SiO_4)^{4-}$, los arreglos carecen de periodicidad. En contraste, en el cuarzo y otras formas de sílice cristalina, los tetraedros $(SiO_4)^{4-}$ están conectados en distintos arreglos periódicos.

Muchos polímeros también muestran arreglos atómicos de corto alcance que se parecen mucho a la estructura del vidrio de silicato. Analizaremos los polímeros en el capítulo 16.

Orden de largo alcance La mayoría de los metales y las aleaciones, los semiconductores, las cerámicas y algunos polímeros tienen una estructura cristalina en la que los átomos o iones muestran un **orden de largo alcance** (OLA); el arreglo atómico especial se extiende sobre escalas de longitud mucho mayores de $\sim >10$ nm. Los átomos o iones que constituyen estos materiales forman un patrón repetitivo regular parecido a una cuadrícula en tres dimensiones. A estos materiales se les conoce como **materiales cristalinos**. Si uno de ellos solo consiste en un único cristal grande, se le conoce como *monocristal*. Los monocristales son útiles en muchas aplicaciones electrónicas y ópticas. Por ejemplo, los chips de computadora se fabrican a partir de silicio en la forma de monocristales grandes (de hasta 12 pulgadas de diámetro) [figura 3-2*a*)]. De manera similar, muchos dispositivos optoelectrónicos útiles se fabrican a partir de cristales de niobato de litio ($LiNbO_3$). Los monocristales también pueden fabricarse como películas delgadas y utilizarse para muchas aplicaciones electrónicas y otras. Ciertos tipos de álabes de turbinas también se fabrican a partir de monocristales de superaleaciones basadas en níquel. Un **material policristalino** está constituido por varios cristales más pequeños con diversas orientaciones en el espacio. A estos cristales más pequeños se les conoce como **granos**. A los límites entre los cristales, donde estos están en desalineamiento, se les llama **límites de grano**. La figura 3-2*b*) muestra la microestructura de un material de acero inoxidable



***a*)** ***b*)**

Figura 3-2 *a*) Fotografía de un monocristal de silicio. (*Petr Sobolev/iStock/Thinkstock*) *b*) Micrografía de un acero inoxidable policristalino que muestra los granos y los límites de los granos. (*Cortesía de los doctores A. J. Deardo, M. Hua y J. García*)

policristalino. Numerosos materiales cristalinos con los que se realizan aplicaciones de ingeniería son policristalinos (por ejemplo, los aceros que se utilizan en la construcción, las aleaciones de aluminio para aviones, etc.). En capítulos posteriores aprenderá que muchas propiedades de los materiales policristalinos dependen de las características físicas y químicas de los granos y de sus límites. Las propiedades de los materiales monocristalinos dependen de la composición química y de las direcciones específicas dentro del cristal (conocidas como direcciones cristalográficas). El orden de largo alcance en los materiales cristalinos puede detectarse y medirse por medio de técnicas como la **difracción de rayos x** o la **difracción de electrones** (vea la sección 3-9).

Los **cristales líquidos** (CL) son materiales poliméricos que tienen un tipo especial de orden. Los polímeros de cristal líquido se comportan como materiales amorfos (de modo parecido a los líquidos) en un estado. Cuando se los somete a un estímulo externo (como un campo eléctrico o un cambio en la temperatura), algunas moléculas de polímero experimentan una alineación y forman pequeñas regiones cristalinas, de ahí el nombre de "cristales líquidos". Estos materiales tienen muchas aplicaciones comerciales en la tecnología de las pantallas de cristal líquido (LCD).

3-2 Materiales amorfos

Cualquier material que sólo tiene un orden de corto alcance de átomos o iones es un **material amorfo**; es decir, es un material no cristalino. En general, se pretende que la mayoría de los materiales formen arreglos periódicos, dado que esta configuración maximiza su estabilidad termodinámica. Los materiales amorfos tienden a formarse cuando, por alguna u otra razón, la cinética del proceso por medio del cual se prepararon no permite la formación de arreglos periódicos. Los **vidrios**, los que por lo general se forman en sistemas cerámicos o poliméricos, son buenos ejemplos de materiales amorfos. De manera similar, ciertos tipos de geles poliméricos o coloidales, o materiales parecidos a geles, también se consideran amorfos. Con frecuencia, los materiales amorfos presentan una mezcla única de propiedades, dado que los átomos o iones no están ensamblados en sus arreglos "regulares" y periódicos. Observe que, con frecuencia, muchos materiales de ingeniería etiquetados como "amorfos" pueden contener una fracción cristalina.

De manera similar a otros vidrios inorgánicos, muchos plásticos también son amorfos. Durante el procesamiento, se enredan entre sí cadenas relativamente grandes de moléculas del polímero, de forma parecida al espagueti. Estas moléculas enredadas no se organizan en materiales cristalinos. Durante el procesamiento de botellas poliméricas de bebidas, se aplica un esfuerzo mecánico para fabricarlas [por ejemplo, para la fabricación de una botella estándar de bebida refrescante de 2 litros se usa tereftalato de polietileno (plástico PET)]. A este proceso se le conoce como **formación por soplado y estiramiento**. En realidad, los esfuerzos radiales (del soplado) y longitudinales (del estiramiento) durante la formación de la botella desenredan algunas de las cadenas de polímero y ocasionan una **cristalización inducida por esfuerzo**. La formación de cristales añade resistencia a las botellas de PET.

En comparación con los plásticos y los vidrios inorgánicos, los metales y las aleaciones tienden a formar materiales cristalinos con bastante facilidad. Como resultado, deben realizarse esfuerzos especiales para enfriar rápidamente los metales y aleaciones a fin de prevenir su cristalización: en el caso de algunas aleaciones se requiere una velocidad de enfriamiento de $>10^6$ °C/s para formar **vidrios metálicos**. A esta técnica de enfriamiento muy rápido de metales y aleaciones se le conoce como **solidificación rápida**. Otras composiciones especiales requieren de tasas de enfriamiento de solo decenas de grados por segundo o menos. Muchos vidrios metálicos tienen propiedades útiles e inusuales. En el capítulo 6 se explicarán las propiedades mecánicas de los vidrios metálicos.

3-3 Red, base, celdas unitarias y estructuras cristalinas

Un sólido común contiene un orden de 10^{23} átomos/cm^3. Para comunicar los arreglos espaciales de los átomos en un cristal, está claro que no es necesario o práctico especificar la posición de cada átomo. Se explicarán dos metodologías complementarias para describir de manera sencilla los arreglos

tridimensionales de los átomos en un cristal. Se hará referencia a ellas como el **concepto de red y base** y el concepto de **celda unitaria**. Estos conceptos están ligados a los principios de la **cristalografía**. En el capítulo 2 se explicó la estructura del átomo. Un átomo consiste en un núcleo de protones y neutrones rodeado por electrones, pero para el propósito de la descripción de los arreglos de átomos en un sólido, se visualizarán los átomos como esferas rígidas, muy parecidas a pelotas de ping-pong. Se comenzará con el concepto de red y base.

Una red es una colección de puntos llamados **puntos de red**, los cuales se arreglan en un patrón periódico, de tal manera que los entornos de cada punto en la red sean idénticos. Una red es una construcción puramente matemática cuya extensión es infinita. Una red puede ser uni, bi o tridimensional. En una dimensión solo existe una red posible: es una línea de puntos separados entre sí por una distancia igual, como se muestra en la figura 3-3*a*). A un grupo de uno o más átomos localizados en una manera en particular respecto uno de otro y asociados con cada punto de red, se le conoce como **motivo** o **base**. La base debe contener por lo menos un átomo, pero puede contener muchos átomos de uno o más tipos. En la figura 3-3*b*) se muestra la base de un átomo. Para obtener una **estructura cristalina** los átomos de la base se deben colocar en cada punto de red (es decir, la estructura cristalina = la red + la base), como se muestra en la figura 3-3*c*). En la figura 3-3*d*) se muestra un cristal unidimensional hipotético que tiene una base de dos átomos distintos. El átomo más grande se ubica en cada punto de red con el átomo más pequeño localizado a una distancia fija sobre el punto de red. Observe que no es necesario que uno de los átomos de la base esté ubicado en cada punto de red, como se muestra en la figura 3-3*e*). Las figuras 3-3*d*) y *e*) representan el mismo

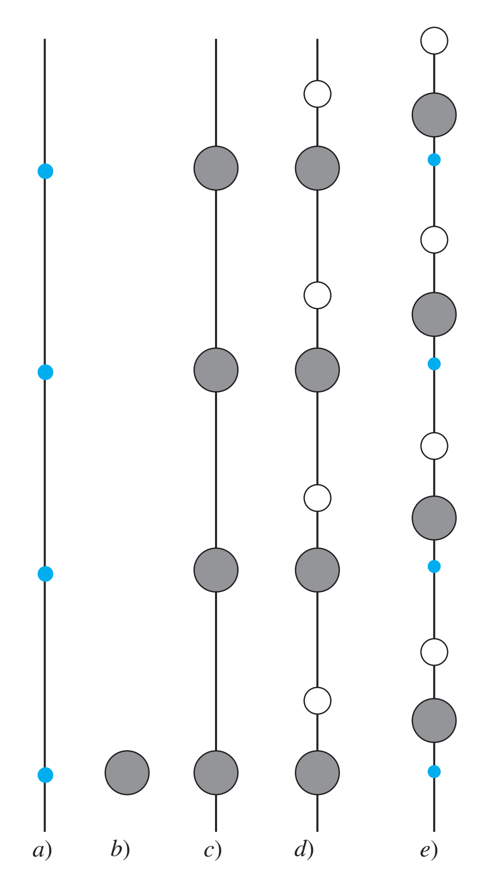


Figura 3-3 Red y base. *a*) Red unidimensional. Los puntos de red están separados por una distancia igual. *b*) Base de un átomo. *c*) Estructura cristalina que se forma colocando la base de *b*) sobre cada punto de red en *a*). *d*) Estructura cristalina que se forma colocando una base de dos átomos de distintos tipos en la red en *a*). *e*) El mismo cristal que el que se muestra en *d*); sin embargo, la base se ha desplazado en relación con cada punto de red.

cristal unidimensional; los átomos simplemente se desplazan de manera relativa entre sí. Tal desplazamiento no modifica los arreglos atómicos en el cristal.

Sólo existe una manera de arreglar los puntos en una dimensión para que cada punto tenga entornos idénticos: un arreglo de puntos separados por una distancia igual, como ya se explicó. Existen cinco maneras distintas de arreglar los puntos en dos dimensiones para que cada punto tenga entornos idénticos: por lo tanto, existen cinco redes bidimensionales. Sólo hay 14 maneras únicas de arreglar los puntos en tres dimensiones. A estos arreglos tridimensionales únicos de puntos de red se les conoce como **redes de Bravais**, nombradas así en honor de Auguste Bravais (1811-1863), quien fue uno de los primeros cristalógrafos franceses. En la figura 3-4 se muestran las 14 redes de Bravais. Como ya se enunció, cada red tiene una extensión infinita, por lo que se muestra una sola celda unitaria de cada red. La celda unitaria es la subdivisión de una red que mantiene las características generales de toda la red. Los puntos de red se localizan en las esquinas de las celdas unitarias y, en algunos casos, en sus caras o en el centro de ellas.

Las 14 redes de Bravais se agrupan en siete **sistemas cristalinos,** que se conocen como cúbico, tetragonal, ortorrómbico, romboédrico (al que también se le llama trigonal), hexagonal, monoclínico y triclínico. Observe que el sistema cristalino cúbico tiene las redes de Bravais cúbica sencilla (CS), cúbica centrada en la cara (CCCa) y cúbica centrada en el cuerpo (CCCu). Estos nombres describen el arreglo de los puntos de red en la celda unitaria. De manera similar, el sistema cristalino tetrago-

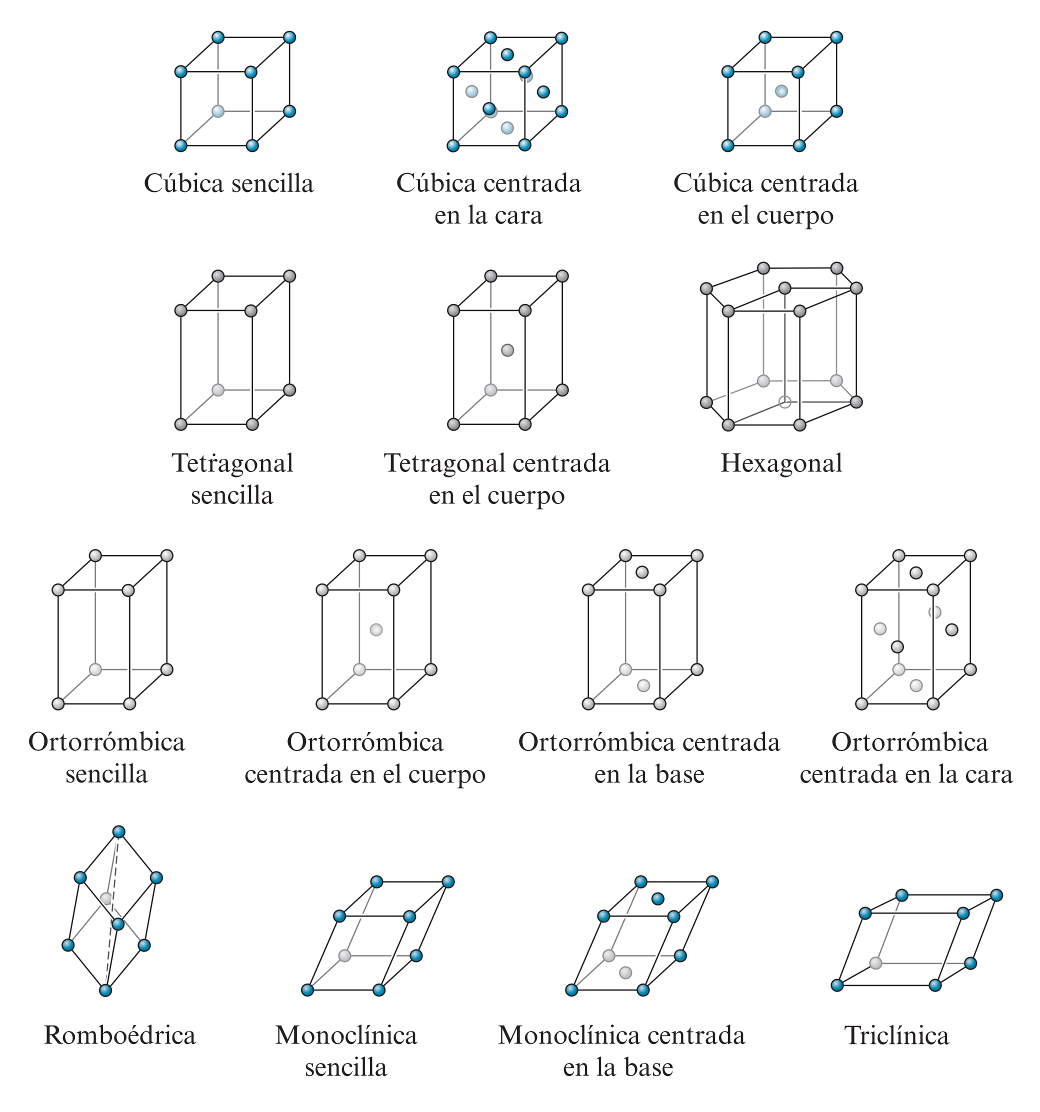


Figura 3-4 Los 14 tipos de redes de Bravais agrupados en los siete sistemas cristalinos. En las figuras 3-6 y 3-11 se muestra la celda unitaria real de un sistema hexagonal.

nal tiene las redes tetragonal sencilla y tetragonal centrada en el cuerpo. De nuevo, recuerde que el concepto de red es matemático y no menciona átomos, iones o moléculas. Solo cuando se asocia una base con una red se puede describir una estructura cristalina. Por ejemplo, si se toma la red cúbica centrada en la cara y se posiciona una base de un átomo sobre cada punto de red, se reproduce la estructura cristalina cúbica centrada en la cara.

Observe que aunque sólo existen 14 redes de Bravais, se puede tener un número infinito de bases. En la naturaleza se observan o pueden sintetizarse cientos de estructuras cristalinas distintas. Muchos materiales diferentes pueden tener la misma estructura cristalina. Por ejemplo, el cobre y el níquel tienen la estructura cristalina cúbica centrada en la cara en la que sólo un átomo está asociado con cada punto de red. En estructuras más complejas, en particular los materiales poliméricos, cerámicos y biológicos, se pueden asociar varios átomos con cada punto de red (es decir, la base es mayor de uno), para formar celdas unitarias muy complejas.

Celda unitaria El objetivo es desarrollar una notación para modelar sólidos cristalinos que comuniquen de manera sencilla y con detalle cómo se arreglan los átomos en el espacio. El concepto de celda unitaria complementa el modelo de red y base para representar una estructura cristalina. Aunque las metodologías de los conceptos de red y base y de celda unitaria son un tanto distintos, el resultado final, la descripción de un cristal, es el mismo.

Nuestro objetivo al elegir una celda unitaria para una estructura cristalina es encontrar una unidad de repetición sencilla que, cuando se duplica y se traslada, reproduce toda la estructura cristalina. Por ejemplo, imagine el cristal como un rompecabezas tridimensional en el que cada pieza es exactamente la misma. Si se sabe a qué se parece una pieza del rompecabezas, se sabe a qué se parece todo el rompecabezas y no se tiene que armarlo todo para resolverlo. ¡Sólo se necesita una pieza! Para comprender el concepto de celda unitaria, se comienza con el cristal. La figura 3-5*a*) muestra un cristal bidimensional hipotético que consiste en átomos del mismo tipo.

Después, se adiciona una cuadrícula que imita la simetría de los arreglos de los átomos. Existe un número infinito de posibilidades para representar la cuadrícula, pero por convención, por lo regular se elige la más sencilla. En el caso del arreglo cuadrado de átomos que se muestra en la figura 3-5*a*) se elige una cuadrícula cuadrada, como la de la figura 3-5*b*). Después, se selecciona la unidad de repetición de la cuadrícula, la cual también se conoce como celda unitaria. Esta es la unidad que, cuando se duplica y traslada por medio de múltiples enteros de las longitudes axiales de la celda unitaria, recrea todo el cristal. En la figura 3-5*c*) se muestra una celda unitaria; observe que en cada una de ellas sólo hay un cuarto de un átomo en cada esquina en dos dimensiones. Siempre se dibujarán círculos llenos para representar los átomos, pero se comprende que sólo la fracción del átomo que está contenido dentro de la celda unitaria contribuye al número total de átomos en cada una de ellas. Por lo tanto, hay 1/4 de átomo/esquina* 4 esquinas = 1 átomo por celda unitaria, como se muestra en la figura 3-5*c*). También es importante observar que, si hay un átomo en una esquina de la celda unitaria, debe haber un átomo en cada esquina de la celda unitaria para mantener la simetría de traslación. Cada celda unitaria tiene su propio origen, como se muestra en la figura 3-5*c*).

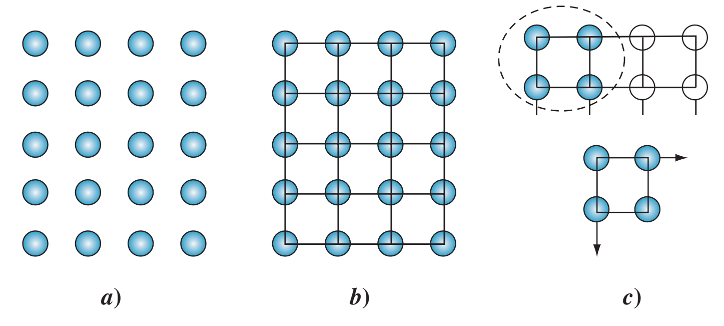


Figura 3-5 Celda unitaria. *a*) Cristal bidimensional. *b*) El cristal con una cuadrícula superpuesta que refleja la simetría del cristal. *c*) Unidad de repetición de la cuadrícula conocida como celda unitaria. Cada celda unitaria tiene su propio origen.

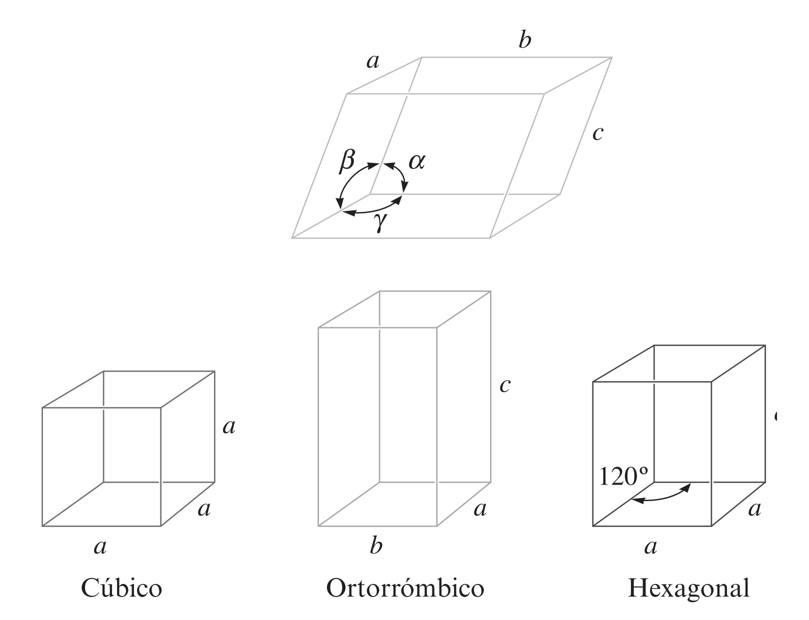


Figura 3-6 Definición de los parámetros de red y su uso en los sistemas cristalinos cúbico, ortorrómbico y hexagonal.

Parámetros de red y ángulos interaxiales

Los **parámetros de red** son las longitudes o dimensiones axiales de la celda unitaria que, por convención, se indican como a, b y c. Los ángulos entre las longitudes axiales, conocidos como ángulos interaxiales, se indican por medio de las letras griegas α, β y γ. Por convención, α es el ángulo entre las longitudes b y c, β es el ángulo entre las longitudes a y c y γ es el ángulo entre las longitudes a y b, como se muestra en la figura 3-6. (Observe que para cada combinación hay una letra a, b y c, ya sea que se escriban en letras griegas o romanas.)

En un sistema cúbico cristalino sólo se debe especificar la longitud de uno de los lados del cubo (en ocasiones se designa como a_0). Con frecuencia, la longitud se da en unidades de nanómetros (nm) o angstrom (Å), donde

$$1 \text{ nanómetro (nm)} = 10^{-9} \text{ m} = 10^{-7} \text{ cm} = 10 \text{ Å}$$
$$1 \text{ angstrom (Å)} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm}$$

En la tabla 3-1 se presentan los parámetros de red y los ángulos interaxiales de las celdas unitarias de los siete sistemas cristalinos.

Tabla 3-1 Características de los siete sistemas cristalinos

Estructura	Ejes	Ángulos entre los ejes	Volumen de la celda unitaria
Cúbica	$a = b = c$	Todos los ángulos son de 90°	a^3
Tegragonal	$a = b \neq c$	Todos los ángulos son de 90°	a^2c
Ortorrómbica	$a \neq b \neq c$	Todos los ángulos son de 90°	abc
Hexagonal	$a = b \neq c$	El ángulo entre a y b es de 120°. Todos los ángulos son iguales y ninguno es de 90°	$0.866a^2c$
Romboédrica o trigonal	$a = b = c$	All angles are equal and none equals 90°	$a^3\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}$
Monoclínica	$a \neq b \neq c$	Dos ángulos de 90°. Un ángulo (β) no es de 90°	$abc \text{ sen } \beta$
Triclínica	$a \neq b \neq c$	Todos los ángulos son distintos y ninguno es de 90°	$abc\sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$

Para definir por completo una celda unitaria, se deben especificar los parámetros de red o razones entre las longitudes axiales, los ángulos interaxiales y las coordenadas atómicas. Cuando se especifican las coordenadas atómicas, todos los átomos se colocan en la celda unitaria. Las coordenadas se especifican como fracciones de las longitudes axiales. Por lo tanto, en el caso de la celda bidimensional que se representa en la figura 3-5*c*), la celda unitaria se especifica por completo por medio de la siguiente información:

Longitudes axiales: $a = b$
Ángulo interaxial: $\gamma = 90°$
Coordenada atómica: (0, 0)

De nuevo, sólo 1/4 del átomo en cada origen (0, 0) contribuye al número de átomos por celda unitaria; sin embargo, cada esquina actúa como un origen y contribuye 1/4 de átomo por esquina para un total de un átomo por celda unitaria. [¿Entiende por qué con un átomo en (0, 0) de cada celda unitaria sería repetitivo también dar las coordenadas (1, 0), (0, 1) y (1, 1)?]

De manera similar, una celda unitaria cúbica con un átomo en cada esquina se especifica por completo por medio de la siguiente información:

Longitudes axiales: $a = b = c$
Ángulos interaxiales: $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Coordenada atómica: (0, 0, 0)

Ahora en tres dimensiones, cada esquina contribuye con 1/8 de átomo a cada una de las ocho esquinas para un total de un átomo por celda unitaria. Observe que el número de coordenadas atómicas que se requieren es igual al número de átomos por celda unitaria. Por ejemplo, si hay dos átomos por celda unitaria, con un átomo en las esquinas y un átomo en la posición centrada en el cuerpo, se requieren dos coordenadas atómicas: (0, 0, 0) y (1/2, 1/2, 1/2).

Número de átomos por celda unitaria

Cada celda unitaria contiene un número específico de puntos de red. Cuando se cuenta el número de puntos de red que pertenecen a cada celda unitaria, se debe reconocer que, al igual que los átomos, los puntos de red pueden estar compartidos por más de una celda unitaria. Un punto de red en una esquina de una celda unitaria está compartido por siete celdas unitarias adyacentes; sólo un octavo de cada esquina pertenece a una celda en particular. Por lo tanto, el número de puntos de red de todas las posiciones en las esquinas en una celda unitaria es:

$$\left(\frac{1/8 \text{ punto de red}}{\text{esquina}}\right)\left(\frac{8 \text{ esquinas}}{\text{celdas}}\right) = \frac{1 \text{ punto de red}}{\text{celda unitaria}}$$

Las esquinas contribuyen con 1/8 de un punto, las caras con 1/2 y las posiciones centradas en el cuerpo, con 1 punto [figura 3-7*a*)].

El número de átomos por celda unitaria es el producto del número de átomos por punto de red y el número de puntos de red por celda unitaria. En la figura 3-7*b*) se muestran las estructuras de las celdas unitarias cúbicas sencilla (CS), cúbicas centradas en el cuerpo (CCCu) y cúbicas centradas en la cara (CCCa).

Radio atómico frente a parámetro de red

Las direcciones en la celda unitaria a lo largo de las cuales los átomos están en contacto continuo se llaman **direcciones compactas**. En las estructuras sencillas, particularmente en aquellas con sólo un átomo por punto de red, se utilizan estas direcciones para calcular la relación entre el tamaño aparente del átomo y el tamaño de la celda unitaria. Cuando se determina de manera geométrica la longitud de la dirección con respecto a los parámetros de red y después se adiciona el número de **radios atómicos** a lo largo de esta dirección, se puede determinar la relación deseada.

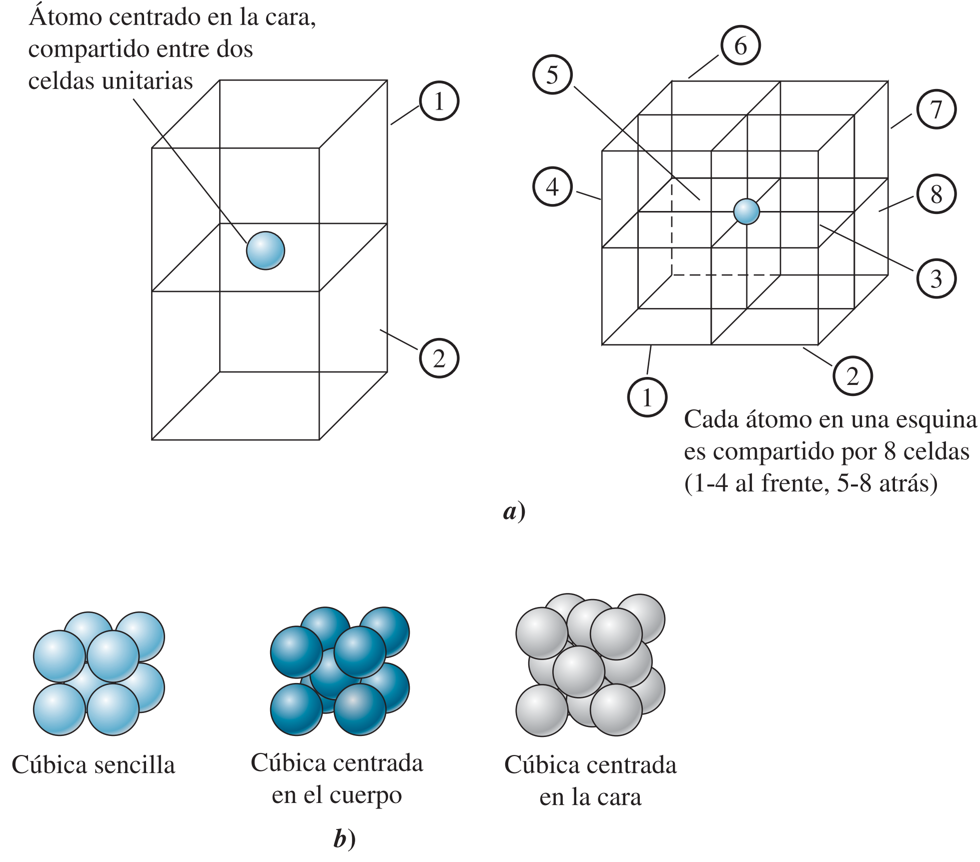


Figura 3-7 *a*) Ilustración que muestra la compartición de los átomos de las caras y las esquinas. *b*) Modelos de celdas unitarias cúbicas sencillas (CS), cúbicas centradas en el cuerpo (CCCu) y cúbicas centradas en la cara (CCCa), suponiendo sólo un átomo por punto de red.

Ejemplo 3-1 *Determinación del número de puntos de red en los sistemas cristalinos cúbicos*

Determine el número de puntos de red por celda en los sistemas cristalinos cúbicos. Si sólo hay un átomo localizado en cada punto de red, calcule el número de átomos por celda unitaria.

SOLUCIÓN

En la celda unitaria CS, los puntos de red sólo están localizados en las esquinas del cubo:

$$\frac{8 \text{ esquinas}}{\text{celda unitaria}} * \frac{1/8 \text{ punto de red}}{\text{esquina}} = \frac{1 \text{ punto de red}}{\text{celda unitaria}}$$

En las celdas unitarias CCCu, los puntos de red se localizan en las esquinas y en el centro del cubo:

$$\frac{8 \text{ esquinas}}{\text{celda unitaria}} * \frac{1/8 \text{ punto de red}}{\text{esquina}} + \frac{1 \text{ centrado en el cuerpo}}{\text{celda unitaria}} * \frac{1 \text{ punto de red}}{\text{centrado en el cuerpo}} = \frac{2 \text{ puntos de red}}{\text{celda unitaria}}$$

En las celdas unitarias CCCa, los puntos de red se localizan en las esquinas y en las caras del cubo:

$$\frac{8 \text{ esquinas}}{\text{celda unitaria}} * \frac{1/8 \text{ punto de red}}{\text{esquina}} + \frac{6 \text{ centrado en la cara}}{\text{celda unitaria}} * \frac{1/2 \text{ punto de red}}{\text{centrado en la cara}} = \frac{4 \text{ puntos de red}}{\text{celda unitaria}}$$

Dado que se supone que sólo se localizan un átomo en cada punto de red, el número de átomos por celda unitaria sería de 1, 2 y 4 en l3as celdas unitarias cúbicas sencillas, cúbicas centradas en el cuerpo y cúbicas centradas en la cara, respectivamente.

Ejemplo 3-2 *Estructura del cloruro de cesio*

Por lo general, a las estructuras cristalinas se les asignan los nombres de un elemento o compuesto representativo que ellas contienen. El cloruro de cesio (CsCl) es un compuesto iónico cristalino. En la figura 3-8 se muestra una celda unitaria de la estructura cristalina del CsCl. La celda unitaria es cúbica. Los aniones cloruro se localizan en las esquinas de la celda unitaria y el catión cesio lo hace en la posición centrada en el cuerpo de cada celda unitaria. Describa esta estructura como una red y base y también defina la celda unitaria del cloruro de cesio.

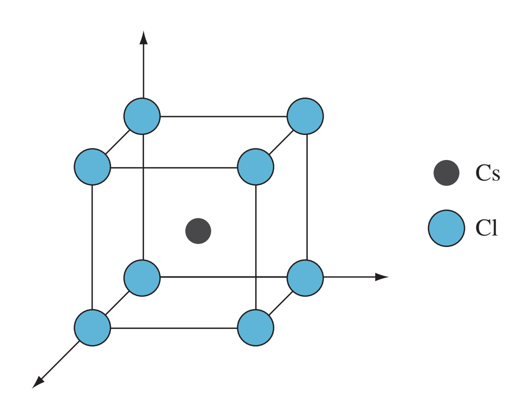


Figura 3-8 Estructura cristalina del CsCl. *Nota*: Los tamaños de los iones no están a escala.

SOLUCIÓN

La celda unitaria es cúbica; por lo tanto, la red es CS, CCCa o CCCu. No hay átomos localizados en las posiciones centradas en la cara; por ello, la red es CS o CCCu. Cada anión Cl está rodeado por ocho cationes Cs en las posiciones centradas en el cuerpo de las celdas unitarias adyacentes. Cada catión Cs está rodeado por ocho aniones Cl en las esquinas de la celda unitaria. Por lo tanto, la esquina y las posiciones centradas en el cuerpo no tienen entornos idénticos, por lo que no pueden ser puntos de red. La red debe ser cúbica sencilla.

La red cúbica sencilla sólo tiene puntos de red en las esquinas de la celda unitaria. La estructura cristalina del cloruro de cesio puede describirse como una red cúbica sencilla con una base de dos átomos, Cl (0, 0, 0) y Cs (1/2, 1/2, 1/2). Observe que las coordenadas atómicas se presentan como fracciones de las longitudes axiales, las cuales son iguales en el caso de una estructura cristalina cúbica. El átomo base de Cl (0, 0, 0) colocado en cada punto de red (es decir, cada esquina de la celda unitaria) explica por completo cada átomo de Cl en la estructura. El átomo base de Cs (1/2, 1/2, 1/2) que se localiza en la posición centrada en el cuerpo con respecto a cada punto de red, explica por completo cada átomo de Cs en la estructura.

Por lo tanto, hay dos átomos por celda unitaria en el CsCl:

$$\frac{1 \text{ punto de red}}{\text{celda unitaria}} * \frac{2 \text{ iones}}{\text{punto de red}} = \frac{2 \text{ iones}}{\text{celda unitaria}}$$

Para definir por completo una celda unitaria, se deben especificar los parámetros de red o razones entre las longitudes axiales, los ángulos interaxiales y las coordenadas atómicas. La celda unitaria del CsCl es cúbica; por lo tanto

$$\text{Longitudes axiales: } a = b = c$$
$$\text{Ángulos interaxiales: } \alpha = \beta = \gamma = 90°$$

Los aniones Cl se localizan en las esquinas de la celda unitaria, mientras que los cationes Cs se ubican en las posiciones centradas en el cuerpo. Por lo tanto,

Coordenadas: Cl (0, 0, 0) y Cs (1/2, 1/2, 1/2)

Al contar los iones por celda unitaria,

$$\frac{8 \text{ esquinas}}{\text{celda unitaria}} * \frac{1/8 \text{ Cl ion}}{\text{esquina}} + \frac{1 \text{ centrado en el cuerpo}}{\text{celda unitaria}} * \frac{1 \text{ Cs ion}}{\text{centrado en el cuerpo}} = \frac{2 \text{ iones}}{\text{celda unitaria}}$$

Como se espera, el número de átomos por celda unitaria es el mismo sin que importe el método empleado para contarlos.

Ejemplo 3-3 *Determinación de la relación entre el radio atómico y los parámetros de red*

Determine la relación entre el radio atómico y el parámetro de red en las estructuras CS, CCCu y CCCa.

SOLUCIÓN

En la figura 3-9 se observa que los átomos se tocan a lo largo de la arista del cubo en las estructuras CS. Los átomos en las esquinas están centrados en las esquinas del cubo, por lo que

$$a_0 = 2r \tag{3-1}$$

En una estructura CCCu, los átomos se tocan a lo largo de la diagonal del cuerpo, la cual es de $\sqrt{3}a_0$ de longitud. Hay dos radios atómicos del átomo centrado y un radio atómico de cada uno de los átomos en las esquinas en la diagonal del cuerpo, por lo que

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{3}} \tag{3-2}$$

En una estructura CCCa, los átomos se tocan a lo largo de la diagonal de la cara del cubo, la cual tiene una longitud de $\sqrt{2}a_0$. Existen cuatro radios atómicos a lo largo de esta longitud: dos radios del átomo centrado en la cara y un radio en cada esquina, por lo que

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}} \tag{3-3}$$

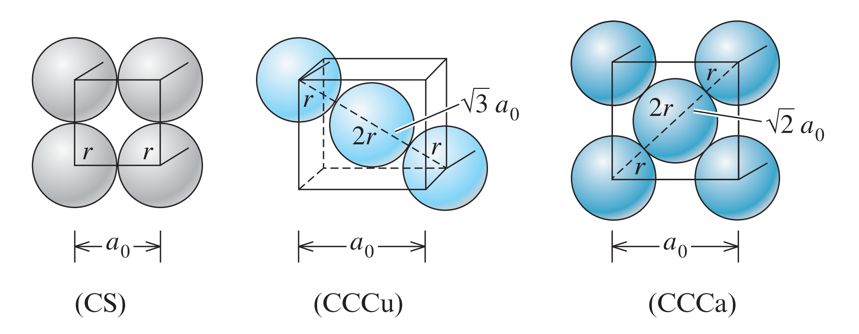


Figura 3-9 Relaciones entre el radio atómico y el parámetro de red en los sistemas cúbicos (del ejemplo 3-3).

Red hexagonal y celda unitaria

La imagen de la red hexagonal en la figura 3-4 refleja la simetría subyacente a la red, pero a diferencia de las demás imágenes de la figura 3-4, no representa la celda unitaria de la red. En la figura 3-6 se muestra la celda unitaria hexagonal. En la

a) *b*)

Figura 3-10 Ilustración del número de coordinación en las celdas unitarias *a*) CS y *b*) CCCu. Seis átomos tocan cada átomo en la celda unitaria CS, mientras que ocho átomos tocan cada átomo en la celda unitaria CCCu.

figura 3-4 puede encontrar la celda unitaria hexagonal. Los parámetros de red de la celda unitaria hexagonal son

Longitudes axiales: $a = b \neq c$
Ángulos interaxiales: $\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$

Cuando los átomos de la celda unitaria sólo están localizados en las esquinas, la coordenada atómica es (0, 0, 0).

Número de coordinación

El **número de coordinación** es el número de átomos que tocan un átomo en particular, o el número de los vecinos más cercanos a él. Esta es una indicación del grado de precisión y eficiencia con que están empaquetados los átomos entre sí. En el caso de sólidos iónicos, el número de coordinación de los cationes se define como el número de aniones más cercanos. El número de coordinación de los aniones es el número de cationes más cercanos. En la sección 3-7 se explicarán las estructuras cristalinas de los distintos sólidos iónicos y otros materiales.

En las estructuras cúbicas que sólo contienen un átomo por punto de red, los átomos tienen un número de coordinación relacionado con la estructura de red. Por inspección de las celdas unitarias de la figura 3-10, se puede observar que cada átomo de la estructura CS tiene un número de coordinación de seis, mientras que cada átomo de la estructura CCCu tiene ocho vecinos más cercanos. En la sección 3-5 se demostrará que cada átomo de la estructura CCCa tiene un número de coordinación de 12, que es el máximo que se puede alcanzar.

Factor de empaquetamiento

El **factor de empaquetamiento** o **fracción de empaquetamiento atómico** es la fracción del espacio que ocupan los átomos, suponiendo que son esferas duras. La expresión general del factor de empaquetamiento es:

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{\text{(número de átomos/celda)(volumen de cada átomo)}}{\text{volumen de la celda unitaria}} \quad (3\text{-}4)$$

El ejemplo 3-4 ilustra cómo se calcula el factor de empaquetamiento de una celda unitaria CCCa.

Ejemplo 3-4 *Cálculo del factor de empaquetamiento*

Calcule el factor de empaquetamiento de la celda unitaria CCCa.

SOLUCIÓN

En la celda unitaria CCCa hay cuatro puntos de red por celda; si hay un átomo por punto de red, también hay cuatro átomos por celda. El volumen de un átomo es $4\pi r^3/3$ y el volumen de la celda unitaria es a_0^3, donde r es el radio del átomo y a_0 es el parámetro de red

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(4 \text{ átomos/celda})\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a_0^3}$$

Dado que en el caso de las celdas unitarias CCCa, $a_0 = 4r/\sqrt{2}$:

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(4)\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{(4r/\sqrt{2})^3} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \cong 0.74$$

El factor de empaquetamiento de $\pi/\sqrt{18} \cong 0.74$ en la celda unitaria CCCa es el empaquetamiento más eficiente posible. Las celdas CCCu tienen un factor de empaquetamiento de 0.68 y las celdas CS tienen un factor de empaquetamiento de 0.52. Observe que el factor de empaquetamiento es independiente del radio de los átomos, siempre que se suponga que todos los átomos tienen un radio fijo. Lo que esto significa es que no importa si los átomos se empacan en celdas unitarias o en balones de basquetbol o en pelotas de tenis de mesa en una caja cúbica. ¡El factor de empaquetamiento máximo alcanzable es $\pi/\sqrt{18}$. A este concepto de geometría discreta se le conoce como **conjetura de Kepler**. Johannes Kepler propuso esta conjetura en 1611 y se mantuvo como tal y sin comprobar hasta 1998, cuando Thomas C. Hales demostró que en realidad es verdadera.

El arreglo CCCa representa una **estructura compacta** (EC) (es decir, la fracción de empaquetamiento es las más alta posible con átomos de un tamaño). Las estructuras CS y CCCu son relativamente abiertas. En la siguiente sección se verá que es posible que una estructura hexagonal tenga la misma eficiencia de empaquetamiento que la estructura CCCa. A esta estructura se le conoce como estructura compacta hexagonal (CH). Los metales con sólo enlazamiento metálico están empaquetados lo más eficientemente posible. Los metales con enlace mixto, como el hierro, pueden tener celdas unitarias menores al factor de empaquetamiento máximo. Por lo general no se encuentran metales o aleaciones de ingeniería que tengan estructura CS.

Densidad

La **densidad** teórica de un material puede calcularse utilizando las propiedades de la estructura cristalina. La fórmula general es

$$\text{Densidad } \rho = \frac{(\text{número de átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de la celda unitaria})(\text{constante de Avogadro})} \quad (3\text{-}5)$$

Si un material es iónico y consiste en distintos tipos de átomos o iones, tendrá que modificarse esta fórmula para que refleje estas diferencias. El ejemplo 3-5 ilustra cómo se determina la densidad del hierro CCCu.

Ejemplo 3-5 *Determinación de la densidad del hierro CCCu*

Determine la densidad del hierro CCCu, el cual tienen un parámetro de red de 0.2866 nm.

SOLUCIÓN

En una celda unitaria de hierro CCCu hay dos átomos.

$$\text{Volumen de la celda unitaria} = (2.866 \times 10^{-8}\ \text{cm})^3 = 2.354 \times 10^{-23}\ \text{cm}^3$$

$$\text{Densidad } \rho = \frac{(\text{número de átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de la celda unitaria})(\text{constante de Avogadro})}$$

$$\rho = \frac{(2\ \text{átomos/celda})(55.847\text{g/mol})}{(2.354 \times 10^{-23}\ \text{cm}^3\ /\text{celda})(6.022 \times 10^{23}\ \text{átomos/mol})} = 7.879\ \text{g/cm}^3$$

La densidad medida es de 7.870 g/cm^3. La ligera discrepancia entre las densidades teórica y medida es consecuencia de los defectos del material. Como ya se mencionó, el término “defecto” en este contexto se refiere a las imperfecciones con respecto al arreglo atómico.

Estructura compacta hexagonal En la figura 3-11 se muestra la estructura compacta hexagonal (CH). La red es hexagonal con una base de dos átomos del mismo tipo: uno localizado en (0, 0, 0) y otro en (2/3, 1/3, 1/2). (Estas coordenadas siempre son fracciones de las longitudes axiales *a*, *b* y *c* incluso si estas no son iguales.) La red hexagonal tiene un punto de red por celda unitaria que se localiza en las esquinas de la celda unitaria. En la estructura CH, dos átomos están asociados con cada punto de red; por lo tanto, hay dos átomos por celda unitaria.

Una representación igualmente válida de la estructura cristalina CH es una red hexagonal con una base de dos átomos del mismo tipo: uno localizado en (0, 0, 0) y otro en (1/3, 2/3, 1/2). Las coordenadas (2/3, 1/3, 1/2) y (1/3, 2/3, 1/2) son equivalentes, lo que significa que no pueden distinguirse entre sí.

En los metales con una estructura CH ideal los ejes a_0 y c_0 están relacionados por la razón $c_0/a_0 = \sqrt{8/3} = 1.633$. Sin embargo, la mayoría de los metales CH tienen razones c_0/a_0 que difieren ligeramente del valor ideal debido al enlace mixto. En razón de que la estructura CH, como la estructura CCCa, tienen el factor de empaquetamiento más eficiente de 0.74 y un número de coordinación de 12, varios metales poseen esta estructura. La tabla 3-2 resume las características de las estructuras cristalinas de algunos metales.

Las estructuras de los metales enlazados de manera iónica pueden verse como formados por medio del empaquetamiento (cúbico o hexagonal) de los aniones. Los cationes entran en los sitios u orificios intersticiales que quedan después del empaquetamiento de los aniones. La sección 3-7 explica este tema con mayor detalle.

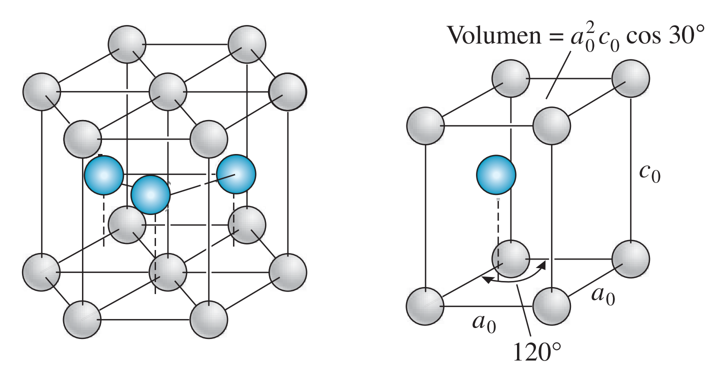


Figura 3-11 Estructura compacta hexagonal (CH) (izquierda) y su celda unitaria.

TABLA 3-2 Características de las estructuras cristalinas de algunos metales a temperatura ambiente

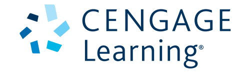
Estructura	a_0 frente a r	Átomos por celda	Número de coordinación	Factor de empaquetamiento	Ejemplos
Cúbica sencilla (CS)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Polonio (Po), α-Mo
Cúbica centrada en el cuerpo (CCCu)	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Cr
Cúbica centrada en la cara (CCCa)	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Cu, Au, Pt, Ag, Pb, Ni
Estructura compacta hexagonal (CH)	$a_0 = 2r$ $c_0 \approx 1.633a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd

Los materiales son un componente de habilitación de lo que los ingenieros pueden imaginar, diseñar y construir. En el límite de la innovación nos encontramos con el descubrimiento o la creación de materiales totalmente nuevos, lo que a menudo es posible gracias a modernas técnicas de procesamiento, que aluden al equilibrio para hacer que los materiales existan en estados metaestables, así como el desarrollo de herramientas para ensamblar, formar y estudiar los materiales a nanoescala.

En la actualidad resulta rutinario analizar la estructura y composición de los materiales a nivel casi atómico, aplicar técnicas como la microscopía de alta resolución electrónica de transmisión, la incidencia rasante de difracción de rayos X y la espectroscopía de pérdida de energía de electrones. Al mismo tiempo, el procesamiento de los materiales ha avanzado hasta el punto en que se pueden generar o depositar láminas delgadas de sólo unas capas atómicas de grosor y fabricar estructuras tridimensionales con dimensiones de decenas de nanómetros o menos. Toda la industria de la electrónica se basa en estos avances.

Lo nuevo en esta edición

- Se incorporan nuevos problemas al final de cada capítulo, hasta incrementar 15% el número de los mismos.
- En el capítulo 15 se ha ampliado el contenido sobre los materiales cerámicos para incluir las cerámicas cristalinas, el sílice y los silicatos, entre otros temas de interés, con la finalidad de proporcionar una visión más completa de esta clase de materiales tan importantes para la ingeniería.
- En el capítulo 14 se actualizó el costo de los materiales comunes en ingeniería.
- Esta edición ha sido adaptada para incorporar en ella el Sistema Internacional de Unidades (Le Système International d'Unité o SI).




ISBN-13: 978-607-526-062-4
ISBN-10: 607-526-062-5

Visite nuestro sitio en http://latinoamerica.cengage.com